



TITLE:

化学反応と電子物性に関する理論的研究

AUTHOR(S):

笛野, 博之

CITATION:

笛野, 博之. 化学反応と電子物性に関する理論的研究. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2014, 2013: 88-88

ISSUE DATE:

2014-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/186375>

RIGHT:

化学反応と電子物性に関する理論的研究

Theoretical Studies of Chemical Reaction and Electronic Properties

工学研究科分子工学専攻量子機能化学講座 笛野 博之

背景と目的

近年、人間に近い柔らかな動きをする家庭用ロボットの開発にあたり、柔軟に伸縮可能なソフトアクチュエーターとして導電性高分子は優れた材料である。本研究では結晶軌道法解析により、ポリピロール鎖間にアニオンをドーブした際の鎖間距離の伸縮に伴って発生する力を理論的に求めた。

結果と考察

ソフトアクチュエーターの負荷特性についての伸縮挙動を表すため基本式[1]に従い、当該高分子材料の長さ、電解伸縮長さ（アニオンがドーブされたときの伸縮長さ）より電解伸縮長さをもたらしするために必要なエネルギー ΔW 、機械的出力エネルギー E_{Mout} を求めた。これらの値を見積もるため、Gaussian09 を用い B3LYP/ 6-31G**法による結晶軌道計算を行った。

ドーブされるアニオンとして TFSI(トリフルオロメタンスルホニルイミド)を用いた。ポリピロール 2 本鎖モデル **A**（単位セルはテトラピロール）、面間に TFSI 分子 1 個がドーブされたときの安定構造 **B** を求めた。

(Fig. 1) TFSI の Mulliken 正味電荷は -0.815 であって、アニオン性はかなり強い。

モデル **A**、**B** の平均面間距

離及びその差 $\Delta d_{\text{av}}(\mathbf{A}-\mathbf{B})$ 、

TFSI が挿入された安定構造から TFSI を除いたピロールモノマー当たり

Table 1 Calculated data for anion drive.

$d_{\text{av}}(\mathbf{A})$ (in Å)	$d_{\text{av}}(\mathbf{B})$ (in Å)	$\Delta d_{\text{av}}(\mathbf{A}-\mathbf{B})$ (in Å)	F (in dyn)	ΔW (in Hartree)	$E_{\text{Mout,max}}$ (in J kg ⁻¹)
5.4092	10.8510	5.3614	4.1202×10^{-6}	2.0260×10^{-2}	2.5543×10^4

の発生力 F 、エネルギー差 ΔW 、及び収縮に伴う単位重量当たりの機械的出力エネルギーの最大値 $E_{\text{Mout,max}}$ を求めた。(Table 1) 本研究で得られた $E_{\text{Mout,max}}$ は 10^4 J kg^{-1} のオーダーであり、実験で報告されている最大値 $9.2 \times 10^{-1} \text{ J kg}^{-1}$ [2] よりかなり大きい、実験からも構成の改良に伴って比較的容易にオーダーを改善できるものであり、本研究における値はある種の上限值を与えるものと考えられる。

参考文献

[1] G. M. Spinks and V.-T. Truong, *Sensors and Actuators A*, **119**, 455 (2005).

[2] 生嶋君弥, J. Stephen, 小野敦, 長光左千男, *Panasonic Tech. J.*, **56**(3), 10 (2010).

発表論文

M. Kobayashi, N. Hayakawa, K. Nakabayashi, T. Matsuo, D. Hashizume, H. Fueno, K. Tanaka, and K. Tamao, *Chemistry Letters*, in press.

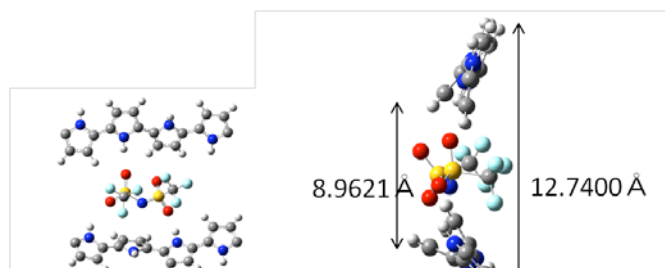


Fig. 1 Two-chain model **B** of polypyrrole doped with a TFSI molecule.